

Conceptos de COMPOSICIÓN Y FRACCIÓN DE FASES, en campos bifásicos.

-Consideremos una aleación binaria A-B, formada por los elementos A y B, la que se descompone en dos fases (Fases 1 y 2).

-Las composiciones se expresarán en términos del contenido del elemento B.

-Las composiciones y las fracciones de las fases presentes se pueden expresar en términos de unidades de peso o de número de átomos. En este problema trabajaremos con composiciones y fracciones expresadas en términos de átomos. (Se operaría de manera similar si la composición se expresase como porcentajes en peso).

Problema

Enunciado

Una aleación está constituida por 6 moles de A y por 8 de B.

Ella se descompone, bajo condiciones de equilibrio, en dos fases sólidas.

La Fase 1 contiene 3 moles de A y 2 de B. La fase 2 contiene 3 moles de A y 6 de B.

Es importante dominar la distinción entre tipos de átomos y de fases. En este ejemplo, en cada fase hay átomos del elemento A y del elemento B.

Nomenclatura y datos:

n_A = # total de átomos de A : 6 moles

n_B = # total de átomos de B : 8 moles

n_{1A} = # de átomos de A en la fase 1 : 3 moles

n_{1B} = # de átomos de B en la fase 1 : 2 moles

n_{2A} = # de átomos de A en la fase 2 : 3 moles

n_{2B} = # de átomos de B en la fase 2 : 6 moles

Preguntas

a) Cálculos de composiciones

- Composición (media) de la aleación, W_0 :

$$W_0 = n_B / (n_A + n_B) \quad W_0 = 8 / 14 = 0,571$$

De cada 1000 átomos en la aleación, 571 son de tipo B. La composición atómica de la aleación es 57,1%B. (A-57,1% át.B)

- Composición de la Fase 1, W_1 :

$$W_1 = n_{B1} / (n_{A1} + n_{B1}) \quad W_1 = 2 / (3+2) = 0,400$$

De cada 1000 átomos en la Fase 1, 400 son de tipo B. La composición atómica de la aleación es 40,0 %B. (A-40,0% át.B)

- Composición de la Fase 2, W_2 :

$$W_2 = n_{B2} / (n_{A2} + n_{B2}) \quad W_2 = 6 / (3+6) = 0,666$$

De cada 1000 átomos en la Fase 2, 666 son de tipo B. La composición atómica de la aleación es 66,6 %B. (A-66,6% át.B)

(Nótese que no existe ninguna razón para que en general $W_1 + W_2$ sea igual a W_0 .)

b) Cálculos de fracciones de fases

b1) Fracciones atómicas de las fases a partir de los moles.

Ya conocemos la composición de cada una de las fases presentes. Ahora queremos saber si hay mucho o poco de cada una de estas fases. Es decir, qué tantos átomos, indistintamente de si son de A o de B, hay en cada fase.

Fracción atómica de la Fase 1, X_1 , y de la Fase 2, X_2 :

$$X_1 =: n_1 / (n_A + n_B) \quad X_1 = (3+2) / (6+8) = 5/14 = 0,357$$

De cada 1000 átomos en la aleación, 357 están en la Fase 1.

$$X_2 =: n_2 / (n_A + n_B) \quad X_2 = (3+6) / (6+8) = 9/14 = 0,643$$

De cada 1000 átomos en la aleación, 643 están en la Fase 2.

Por conservación de masa, debe cumplirse: $X_1 + X_2 = 1$. Esto porque los átomos del sistema que no están en una fase tienen que estar en la otra. (Hay dos fases).

b2) Fracciones de fases a partir de las composiciones

Los diagramas de fases proporcionan como datos composiciones de las fases (valores que anteriormente fueron calculados por quien hizo el diagramas a partir de datos en moles).

De modo que es interesante calcular las fracciones de las fases a partir de las composiciones (y no de los moles). Para ello se aplica la regla de la Palanca a partir de los datos de las tres composiciones:

$$\begin{array}{c} \text{(Fase 1)} \quad /-----/-----/ \quad \text{(Fase 2)} \\ W_1 \quad W_0 \quad W_2 \end{array}$$

$$X_1 = (W_2 - W_0) / (W_2 - W_1) \quad y \quad X_2 = (W_0 - W_1) / (W_2 - W_1)$$
$$X_1 = (0,666 - 0,571) / (0,666 - 0,400) = 0,357$$
$$y \quad X_2 = (0,571 - 0,400) / (0,666 - 0,400) = 0,643$$

Otro procedimiento para X_2 , ya calculado X_1 : $X_2 = (1 - X_1) = 1 - 0,357 = 0,643$

Deducción de la Regla de la Palanca (aplicable a campos bifásicos)

Se busca determinar X_1 y X_2 a partir de los datos de composición W_0 , W_1 y W_2 .

Ecuaciones de partida:

$$W_0 =: n_B / (n_A + n_B) \quad y \quad de \quad X_2 = 1 - X_1$$

Trabajando con W_0

$$W_0 = (n_{B1} + n_{B2}) / (n_A + n_B)$$

$$W_0 = (n_{B1}) / (n_A + n_B) + (n_{B2}) / (n_A + n_B)$$

$$W_0 = \{n_{B1} / (n_{A1} + n_{B1})\} * \{(n_{A1} + n_{B1}) / (n_A + n_B)\} + \{n_{B2} / (n_{A2} + n_{B2})\} * \{(n_{A2} + n_{B2}) / (n_A + n_B)\}$$

Considerando algunas definiciones previas: $W_0 = W_0 X_1 + W_2 X_2$

Reemplazando $X_2 = 1 - X_1$, se llega a: $W_0 = W_1 X_1 + W_2(1 - X_1)$

Despejando, finalmente: $W_1 = (W_2 - W_0)/(W_2 - W_1)$

Es sencillo llegar ahora a una expresión para W_2 .

Dos observaciones

A)

Si los datos vienen en términos atómicos, se usan las ecuaciones del caso y los resultados se obtendrán también en términos atómicos.

Si los datos vienen en términos de peso, se usan las mismas ecuaciones anteriores, y los resultados se obtendrán también en términos de peso.

Solo cuando se quiere pasar de datos en términos atómicos a datos en términos de peso, o viceversa, para la transformación se emplean las masas molares de los elementos.

B)

Cuando se quiere calcular la fracción de fases presentes, X , en un campo bifásico, hay dos formas de hacerlo, dependiendo de los datos de partida:

- 1) Si los datos de partida son los n del problema anterior, se usan las ecuaciones básicas de definición indicadas en ese problema.
- 2) Si los datos provienen de un diagrama de equilibrio, eso quiere decir que los datos son las composiciones, W . En tal caso se usa la regla de la Palanca.